Ferdowsi University of Mashhad

Journal of Metallurgical and Materials Engineering

https://jmme.um.ac.ir

Iron&Steel Society of Iran

Effect of Polydimethylsiloxane (PDMS) on Silica Coating Produced by Sol – Gel Method*

Research Article

Najme lari[1], Shahrokh Ahangarani[2]

DOI: 10.22067/jmme.2025.92000.1184

1. Introduction

The efficiency of photovoltaic (PV) solar cells is strongly influenced by the amount of light that reaches the active semiconductor layer. One of the most effective strategies to reduce reflection losses and enhance light absorption is the application of anti-reflective (AR) coatings. Silica (SiO_2) has been widely employed for this purpose due to its low refractive index, high chemical stability, and optical transparency. However, silica coatings prepared by sol–gel methods often suffer from inherent brittleness and susceptibility to moisture absorption, which can degrade their long-term performance. To address these limitations, researchers have explored the incorporation of polymers with hydrophobic and flexible properties. Polydimethylsiloxane (PDMS) is particularly attractive because of its low refractive index (~1.4), high transparency in the UV–visible range, and ability to form strong covalent bonds with glass substrates. Moreover, PDMS introduces hydrophobic methyl groups into the coating structure, which can significantly reduce water adsorption and improve self-cleaning behavior. This study investigates the effect of PDMS on silica coatings prepared by the sol–gel method, focusing on both optical and surface properties.

2. Methods

Two approaches were adopted for PDMS incorporation:

1. **Method s-h:** PDMS was added directly into the silica sol before dip-coating.
2. **Method s-a:** PDMS was deposited onto pre-formed silica coatings by immersion in a hydrophobic solution.

The coatings were prepared using dip-coating at a withdrawal speed of 25 mm/min, followed by multi-step thermal treatment up to 350 °C to ensure structural stabilization. The samples were characterized using:

- **UV–Vis spectroscopy** to measure optical transmittance.
- **FT-IR spectroscopy** to identify chemical groups and bonding.
- **Scanning electron microscopy (SEM)** to observe morphology and particle size.
- **Contact angle measurements** to evaluate surface hydrophobicity.

3. Results

The optical measurements revealed that both s-h and s-a coatings achieved approximately 93% transmittance, compared to 90% for uncoated glass. This improvement demonstrates the effectiveness of PDMS in reducing the refractive index mismatch and enhancing light transmission. FT-IR spectra confirmed the presence of Si–CH_3 groups, indicating successful incorporation of PDMS. The s-a samples exhibited reduced hydroxyl groups and lower water absorption compared to s-h, highlighting the advantage of direct deposition in minimizing surface hydrophilicity.

SEM analysis showed in Fig.1 distinct differences in morphology:

- s-h coatings contained larger particles (~30 nm) with more uniform distribution.
- s-a coatings exhibited smaller particles (~15 nm) but with surface heterogeneity and visible spots due to incomplete thermal treatment after PDMS deposition.

Contact angle measurements in Fig 2 demonstrated a significant increase in hydrophobicity. While bare glass showed a contact angle of ~25°, PDMS-modified coatings reached ~95°, confirming excellent water repellency.

* Manuscript received February 03, 2025, Revised July 27, 2025, Accepted November 29, 2025.

[1] Corresponding author: Assistant Professor, Department of Chemical and Materials Engineering, Sirjan University of Technology, sirjan, iran. **Email:** n.lari@sirjantech.ac.ir

[2] Associated professor,Advanced Materials and Renewable Energies Department, Iranian Research Organization for Science and Technology, Tehran, Iran. **Email**: ahangarani@irost.ir

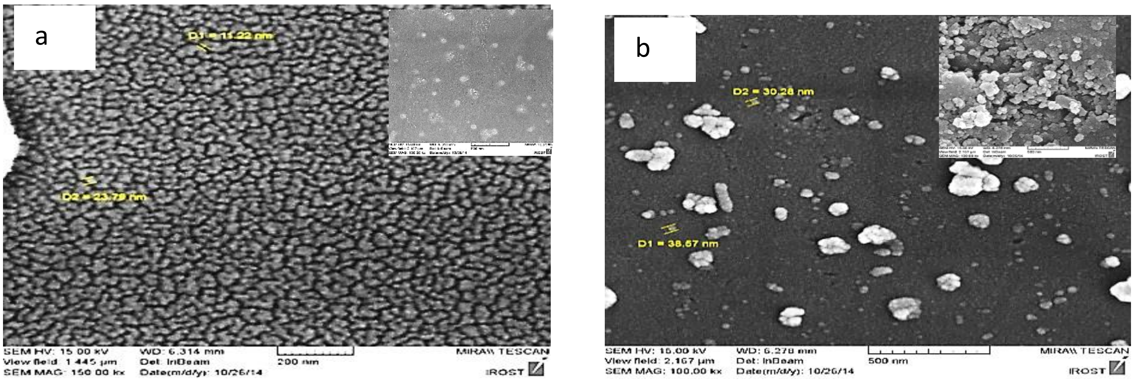


Figure 1: Microscopic images of silica coatings containing polydimethylsiloxane (a) s-a coating, (b) s-h coating

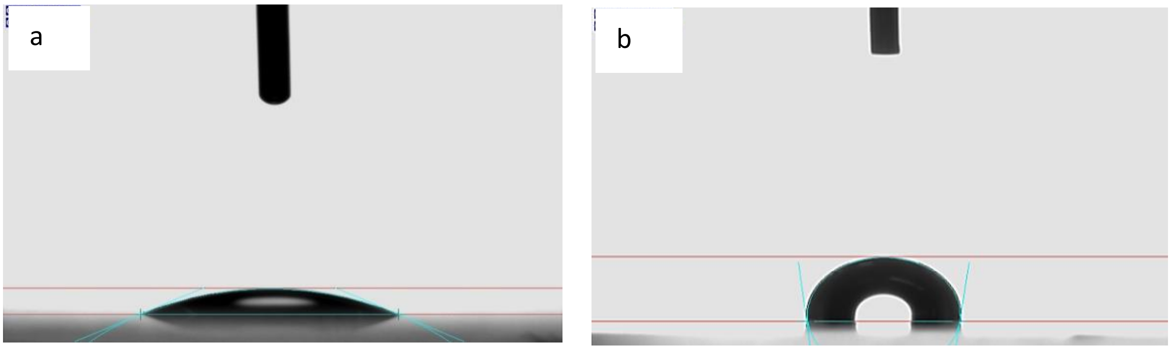


Figure 2: Contact angle of a) uncoated glass, b) with silica coating containing polydimethylsiloxane

4. Discussion

The results suggest that PDMS plays a dual role in silica coatings. First, it chemically interacts with hydroxyl groups on silica particles, forming strong Si–O–Si bonds that enhance mechanical stability. Second, it introduces hydrophobic methyl groups, which reduce water adsorption and improve self-cleaning properties. The s-h method provided more uniform coatings with better structural integrity, while the s-a method offered superior hydrophobicity but at the expense of surface uniformity. These findings highlight the importance of optimizing the PDMS incorporation strategy depending on the desired balance between optical performance and surface properties. Although both coatings have performed their role well.

5. Conclusion

Incorporating PDMS into silica coatings via sol–gel processing significantly improves both optical and surface characteristics. The coatings achieved high transmittance (~93%), excellent hydrophobicity (95° contact angle), and reduced moisture absorption. The s-h method is advantageous for producing uniform coatings with strong covalent bonding, whereas the s-a method enhances hydrophobicity. Overall, PDMS-modified silica coatings represent a promising solution for durable, self-cleaning, and high-performance anti-reflective layers in photovoltaic applications. The approach can potentially be extended to other optical devices where transparency, mechanical stability, and resistance to environmental degradation are critical.

مهندسی متالورژی و مواد

https://jmme.um.ac.ir/

انجمن آهن و فولاد ایران

دانشگاه فردوسی مشهد

تأثیر ماده پلی دی متیل سیلوکسان (PDMS) بر پوشش سیلیکا تولید شده به روش سل ـ ژل*

مقاله پژوهشی

نجمه لاری[۱] شاهرخ آهنگرانی[۲]

DOI: 10.22067/jmme.2025.92000.1184

چکیده به منظور کاهش بازتاب نور و افزایش بهره‌وری سلول‌های خورشیدی، استفاده از پوشش سیلیکا بر سطح شیشه رایج است. با این حال، شکنندگی ذاتی این پوشش‌ها می‌تواند عملکرد مکانیکی آن‌ها را محدود کند. در این پژوهش، پلیمر پلی‌دی‌متیل‌سیلوکسان (PDMS) به عنوان ماده‌ای با پیوندهای پلیمری منعطف و خاصیت آب‌گریزی، به منظور بهبود خواص مکانیکی و سطحی پوشش‌ها مورد بررسی قرار گرفت. دو رویکرد برای اعمال PDMS ارزیابی شد: نخست، استفاده از آن در فرایند ساخت سل، و دوم، لایه‌نشانی مستقیم بر روی پوشش سیلیکا. برای تحلیل عملکرد نمونه‌ها، از روش‌های طیف‌سنجی عبوری در ناحیه مرئی ـ فرابنفش (UV-Vis)، طیف‌سنجی مادون قرمز تبدیل فوریه (FT-IR)، میکروسکوپ الکترونی روبشی (SEM) و آزمون زاویه تماس بهره گرفته شد. نتایج نشان دادند که هر دو نوع پوشش دارای عبور نوری حدود ۹۳٪ هستند که نسبت به شیشه بدون پوشش (٪۹۰) بهبود قابل توجهی دارد. همچنین، زاویه تماس قطره آب با سطح پوشش برابر با ۹۵ درجه اندازه‌گیری شد که نشان دهنده آب‌گریزی مطلوب سطح است. این ویژگی ناشی از حضور PDMS است و انتظار می‌رود که جذب رطوبت در طول زمان کاهش یابد و خواص نوری پوشش پایدار باقی بماند.

واژه‌های کلیدی پوشش ضدبازتاب، آب‌گریز، سیلیکا، پلی دی متیل سیلوکسان، سل ـ ژل.

Effect of Polydimethylsiloxane (PDMS) on Silica Coating Produced by Sol-gel Method

Najme lari Shahrokh Ahangarani

Abstract *To reduce light reflection and enhance the efficiency of solar cells, silica coatings are commonly applied to glass surfaces. However, the inherent brittleness of these coatings can limit their mechanical performance. In this study, polydimethylsiloxane (PDMS), a flexible polymer with hydrophobic properties, was investigated to improve both mechanical and surface characteristics of the coatings. Two approaches were evaluated: incorporating PDMS during the cell fabrication process, and directly depositing it onto the silica coating. The performance of the samples was assessed using UV-Visible transmission spectroscopy, Fourier-transform infrared spectroscopy (FT-IR), scanning electron microscopy (SEM), and contact angle measurement using deionized water droplets. The results showed that both types of coatings exhibited approximately 93% light transmittance, which is a significant improvement compared to uncoated glass (90%). Additionally, the contact angle of water droplets on the coated surface was measured at 95°, indicating excellent hydrophobicity. This property is attributed to the presence of PDMS, suggesting that moisture absorption over time will be minimized and the optical performance of the coating will remain stable.*

Keywords Anti-reflective coating, Hydrophobicity, Silica, Polydimethylsiloxane, Sol-gel.

---

* تاریخ دریافت مقاله ۱۴۰۳/۱۱/۱۵ و تاریخ پذیرش آن ۱۴۰۴/۹/۸ می‌باشد.

(۱) نویسنده مسئول: استادیار، دانشگاه صنعتی سیرجان، بخش مهندسی شیمی و مواد، سیرجان، ایران، **Email:** n.lari@sirjantech.ac.ir

(۲) دانشیار، سازمان پژوهش های علمی و صنعتی ایران، پژوهشکده مواد پیشرفته و انرژی های نو، تهران، ایران، ایمیل: **r**

مقدمه

در دهه‌های اخیر، نگرانی‌های زیست‌محیطی ناشی از استفاده گسترده از سوخت‌های فسیلی، از جمله گرم شدن زمین و باران‌های اسیدی، توجه جهانی را به سوی منابع انرژی تجدیدپذیر معطوف کرده است. در این میان، انرژی خورشیدی به عنوان منبعی پاک، پایدار و در دسترس در تمام طول سال، جایگاه ویژه‌ای در میان فناوری‌های نوین تولید انرژی یافته است [1]. در این میان، پنل‌های خورشیدی فتوولتائیک (PV) به عنوان یکی از مؤثرترین ابزارهای تبدیل انرژی خورشیدی به برق، نقش کلیدی ایفا می‌کنند. با این حال، بازدهی این پنل‌ها به شدت تحت تأثیر میزان عبور نور به سطح سلول‌های خورشیدی قرار دارد. به منظور کاهش بازتاب نور و افزایش جذب آن، پوشش‌های ضدبازتاب (Anti-Reflective Coatings – ARCs) توسعه یافته‌اند. پوشش‌های ضدبازتاب با بهبود عبور نور در محدوده طول موج مرکزی ۵۵۰ نانومتر، که بیشترین حساسیت سلول‌های PV در آن قرار دارد، عملکرد نوری پنل‌ها را بهینه می‌سازند. ضریب شکست (Refractive Index – RI) یکی از پارامترهای کلیدی در طراحی پوشش‌های ضدبازتاب است، چرا که شفافیت محیط و میزان عبور نور را تعیین می‌کند. بر اساس معادله لرد ریلی (Lord Rayleigh)، ضریب شکست ایدئال برای کاهش بازتاب باید در حدود ۱٫۲۲ باشد. دستیابی به چنین ضریب شکستی معمولاً از طریق ایجاد ساختارهای متخلخل یا چندلایه امکان‌پذیر است. در این راستا، دی‌اکسید سیلیکون (SiO_2) به دلیل ضریب شکست پایین، پایداری شیمیایی بالا، فراوانی در طبیعت و شفافیت مناسب، به عنوان ماده‌ای پرکاربرد در ساخت پوشش های ضدبازتاب شناخته می‌شود [2-4]. با این حال، یکی از چالش‌های مهم در عملکرد بلندمدت پوشش‌های ضدبازتاب تجمع گرد و غبار و رطوبت بر سطح آن‌هاست که می‌تواند عبور نور را کاهش دهد و خواص نوری و مکانیکی پوشش را تخریب کند. تخلخل پوشش به منظور ضریب شکست کمتر باید توسط هوا پر شده باشد. اگر با اشیای دیگر پر شوند، ضریب شکست و بازتاب افزایش می‌یابد. از این‌رو، افزودن ویژگی‌هایی نظیر مقاومت در برابر سایش و خاصیت خودتمیزشوندگی، به‌ویژه خودتمیزشوندگی آب‌گریز، به عنوان راهکاری مؤثر در افزایش دوام و کارایی این پوشش‌ها مطرح شده است [5-8]. در این راستا، پلیمرهای آب‌گریز متعددی از جمله پلی‌دی‌متیل‌سیلوکسان (Polydimethylsiloxane) (PDMS)، پلی‌متیل‌متاکریلات (PMMA) و پلی‌تترافلوئوروواتیلن (PTFE) در ساخت این پوشش‌ها به‌کار گرفته شده‌اند. در میان این مواد، PDMS به دلیل دارا بودن ضریب شکست پایین، شفافیت بالا در ناحیه فرابنفش ـ مرئی (بیش از ۸۵٪)، و قابلیت ایجاد پیوندهای قوی با زیرلایه‌های شیشه‌ای، به عنوان یکی از گزینه‌های برجسته در طراحی پوشش‌های خودتمیزشونده شناخته می‌شود [9]. واکنش‌های هیدرولیز و چگالش PDMS و TEOS در شکل (۱) مشاهده می‌شود. مولکول پلی دی متیل سیلوکسان (PDMS) گروه‌های هیدروکسیل و متیل بسیاری دارد. گروه‌های هیدروکسیل PDMS می‌توانند با گروه‌های هیدروکسیل سطح ذرات سیلیکا دهیدراته و در نتیجه پیوند کووالانسی مابین ذرات سیلیکا ایجاد می‌شود. همچنین گروه‌های آب‌گریز متیل وارد پوشش می‌کند و در نتیجه آب‌گریزی پوشش‌ها بهبود می‌یابد [10]. بر اساس مطالعات انجام شده، PDMS رفتار مکانیکی، انعطاف‌پذیری و شکل‌پذیری را بهبود می‌دهد و تردی را حذف می‌کند. برای ساختار متخلخل، این ماده به شدت سطح ویژه را کاهش می‌دهد و در نتیجه تخلخل‌ها یکنواخت و آن‌ها را به هم پیوند می‌دهند. درجه کاهش بستگی به مقدار PDMS دارد. هر چه مقدار بیشتر، سطح ویژه بیشتر کاهش می‌یابد [11]. پژوهشگران نشان دادند، PDMS چقرمگی و انعطاف‌پذیری شبکه ژل را با کاهش در فشار کاپیلاری افزایش می‌دهد. لذا می‌توان پوشش‌هایی با ضخامت بیشتر و بدون ترک تولید کرد [12].

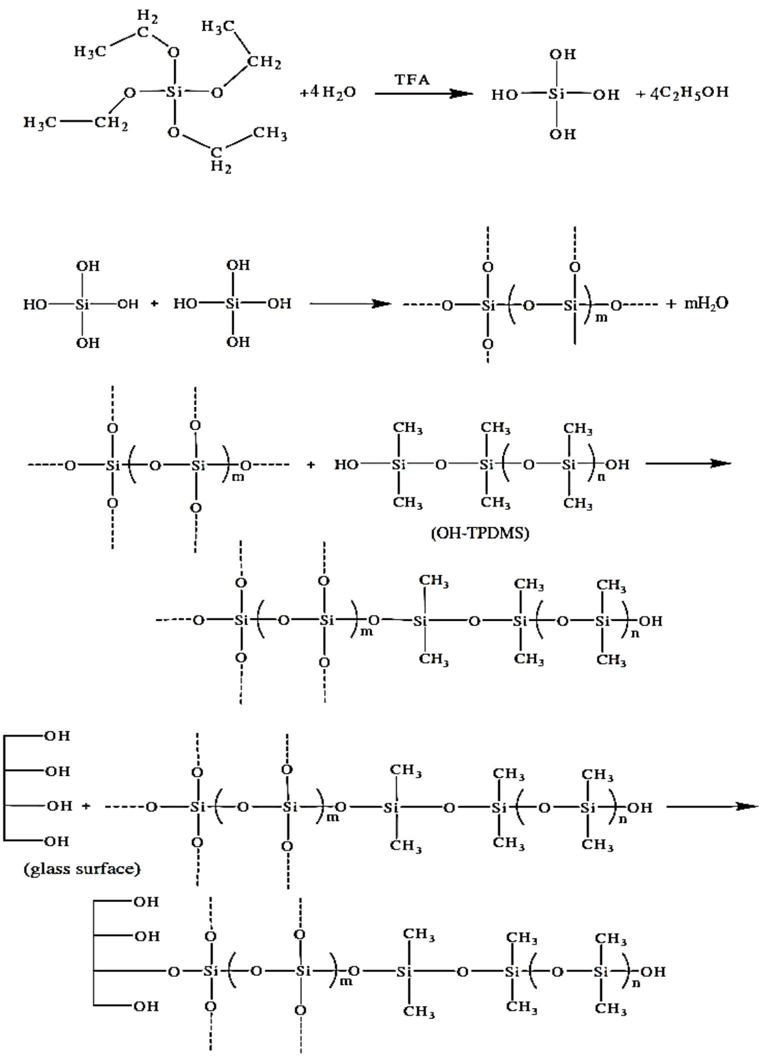
در این پژوهش، به منظور افزایش پایداری عملکرد پوشش‌های ضدبازتاب، دو هدف همزمان دنبال شد: ۱. دستیابی به خاصیت ضدبازتابی و ۲. ایجاد خاصیت آب‌گریزی سطح. برای تحقق این اهداف، از دی‌اکسید سیلیکون (SiO_2) به دلیل برخورداری از ضریب شکست پایین جهت بهبود عبور نور، و از پلی‌دی‌متیل‌سیلوکسان (PDMS) به عنوان ماده‌ای با ویژگی آب‌گریزی، استفاده گردید. فرایند پوشش‌دهی با بهره‌گیری از روش غوطه‌وری (Dip-Coating) انجام شد؛ این روش به دلیل سادگی اجرا، قابلیت پوشش‌دهی سطوح با هندسه پیچیده، و امکان دستیابی به لایه‌ای یکنواخت و همگن، انتخاب گردید [2,9].

۱) هیدرولیز TEOS

۲) چگالش TEOS هیدرولیز شده

۳) واکنش چگالش با -OH TPDMS

۴) پیوند شیمیایی TEOS-PDMS با سطح شیشه



شکل ۱ واکنش‌های هیدرولیز و چگالش PDMS و TEOS [12]

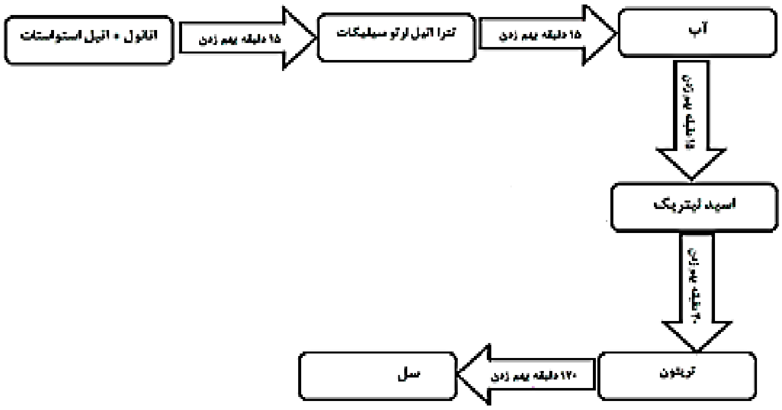
روش پژوهش

برای ساخت سل سیلیکا از مواد زیر استفاده شد:

تترا اتیل ارتوسیلیکات (TEOS, Merck Chemicals (800658), purity> 98%) یک آلکوکسید است. در این پژوهش آلکوکسید به دلیل دارا بودن حلقه هیدروکربنی بلند، متقارن و توانایی بهتر مخلوط شدن و شرکت در واکنش‌ها، انتخاب گردید. اتیل استواستات (Ethyl acetoacetate (EAA), Sigma-Aldrich Chemicals (809622), purity 99%) به عنوان عامل جمع کننده (Chelating agent) و پایدار کننده ترکیبات آلی مورد استفاده قرار می‌گیرد. عامل جمع کننده همانند چنگک ترکیبات آلی سیلسیم را جذب می‌کند و از پراکندگی، رسوب و عدم یکنواختی در سطح پوشش جلوگیری می‌کند. اتانول (EtOH, absolute IRAN grade) به عنوان حلال ترکیبات آلی و آلکوکسیدی و آب مقطر (H2O, distilled water) به منظور واکنش‌های هیدرولیز و چگالش استفاده می‌شود. اسید نیتریک (HNO3, Merck Chemicals (100456) purity 65%) به عنوان کاتالیست و تسریع کننده استفاده می‌شود. پلی دی متیل سیلوکسان (PDMS, Sigma-Aldrich Chemicals (482005) purity 99%) به عنوان ماده پیوند دهنده و آب‌گریز استفاده گردید. تریتون (TX-100, Sigma-Aldrich Chemicals, purity 99%) به عنوان افزودنی تخلخل‌زا به مقدار ۴۰ گرم بر لیتر مورد استفاده قرار گرفت. زیرا تخلخل منجر به کاهش ضریب شکست و در نتیجه افزایش عبور نور می‌شود.

سل‌های سیلیکا با نسبت‌های مولی و دیاگرام شکل (۲) آماده شدند:

$$H_2O: EtOH: TEOS: HNO_3 = 1:3.5:0.175:0.01$$



شکل ۲ نحوه آماده‌سازی سل‌های سیلیکا

برای آماده‌سازی محلول، از دستگاه هیتر مگنت ساخت ایران (برند آلفا) با سرعت چرخش ۲۵۰ دور بر دقیقه (rpm) استفاده شد. پس از هم‌زدن کامل، محلول به مدت ۲۴ ساعت در شرایط محیطی جهت انجام فرایند پیرسازی نگه‌داری گردید. در مرحله بعد، محلول پیر شده در بشر مخصوص به دستگاه پوشش‌دهی غوطه‌وری ساخت ایران منتقل شد. پیش از انجام عملیات پوشش‌دهی، لام‌های آزمایشگاهی ابتدا با آب مقطر و سپس با اتانول شستشو داده شده و در دمای محیط خشک شدند. لام‌های خشک شده در دستگاه غوطه‌وری قرار گرفتند و فرایند پوشش‌دهی با سرعت رفت و برگشت ۲۵ میلی‌متر بر دقیقه و زمان غوطه‌وری ۳۰ ثانیه انجام شد. پس از اعمال پوشش، نمونه‌ها برای مدت کوتاهی در هوای آزاد قرار گرفتند تا خشک شوند. در نهایت، برای تثبیت پوشش، نمونه‌ها به کوره برنامه‌دار ساخت ایران منتقل گردیدند.

برای ارزیابی اثر ماده پلی‌دی‌متیل‌سیلوکسان، دو روش متفاوت مورد استفاده قرار گرفت:

۱. روش اول. افزودن PDMS به سل سیلیکا گروه (h): در این روش، مقدار ۲ میلی‌لیتر پلی‌دی‌متیل‌سیلوکسان به ۵۰ میلی‌لیتر محلول سل سیلیکا اضافه شد. نمونه‌های تهیه شده با این روش تحت عنوان گروه h نام‌گذاری شدند.

۲. روش دوم. اصلاح پوشش تک‌لایه سیلیکا با PDMS گروه (a): در این روش، پس از آماده‌سازی پوشش تک‌لایه سیلیکا، نمونه‌ها به مدت ۳۰ ثانیه و با سرعت غوطه‌وری ۲۵ میلی‌متر بر دقیقه در محلول آب‌گریز حاوی پلی‌دی‌متیل‌سیلوکسان غوطه‌ور شدند. این گروه با پسوند a شناخته می‌شود.

فرایند عملیات حرارتی نمونه‌ها:

بر اساس نتایج تحقیقات و با در نظر گرفتن دمای تبخیر آب و تجزیه ماده تریتون، عملیات حرارتی به صورت زیر انجام می‌شود:

۱. مرحله اول: در مدت ۳۰ دقیقه، دمای نمونه‌ها به ۱۲۰ درجه سانتی‌گراد افزایش می‌یابد. سپس به مدت ۱۵ دقیقه در این دما باقی می‌مانند تا رطوبت موجود کاملاً تبخیر شود.

۲. مرحله دوم: دما در مدت ۳۰ دقیقه به ۲۷۰ درجه سانتی‌گراد می‌رسد. در این دما نیز نمونه‌ها به مدت ۱۵ دقیقه نگهداری می‌شوند تا فرایند تجزیه تریتون آغاز گردد.

۳. مرحله سوم: طی ۴۵ دقیقه، دما به ۳۵۰ درجه سانتی‌گراد افزایش می‌یابد. سپس نمونه‌ها به مدت ۳۰ دقیقه در این دما باقی می‌مانند تا واکنش‌های نهایی کامل شده و ساختار ماده تثبیت شود.

۴. مرحله پایانی: پس از اتمام مراحل حرارتی، نمونه‌ها به‌صورت تدریجی و کنترل‌شده درون کوره سرد می‌شوند تا از بروز شوک حرارتی و ترک‌خوردگی جلوگیری شود.

پس از آماده‌سازی نمونه‌ها به منظور بررسی رفتار نوری پوشش‌ها از دستگاه طیف‌سنجی UV-VIS (Jasco V-570) استفاده گردید. به منظور بررسی گروه‌های عاملی به وجود آمده بر سطح پوشش از دستگاه طیف‌نگاری مادون قرمز FT-IR (Jasco v-550) استفاده شد. طیف‌نگاری مادون قرمز یک ابزار قدرتمند برای بررسی گروه‌های شیمیایی موجود در پوشش‌ها می‌باشد [13]. طیف‌نگاری جذب در محدوده cm^{-1} ۴۰۰۰–۴۰۰ انجام گردید. برای بررسی پیوندهای پوشش، شیشه بدون پوشش به عنوان مرجع در نظر گرفته شد. به منظور بررسی مورفولوژی، اندازه ذرات و ضخامت از میکروسکوپ الکترونی روبشی -FE

بهره گرفته شد. برای آماده‌سازی SEM (MIRA II LMU) نمونه‌ها به ابعاد ۱×۱ سانتی متر مربع برش داده شدند. به منظور بررسی خاصیت خود تمیز شوندگی از تست ترشوندگی استفاده شد. برای این تست از دستگاه Contact angle instrument (Data Physics OCA 15 plays) استفاده شد.

نتایج و بحث

طیف‌نگاری مادون قرمز

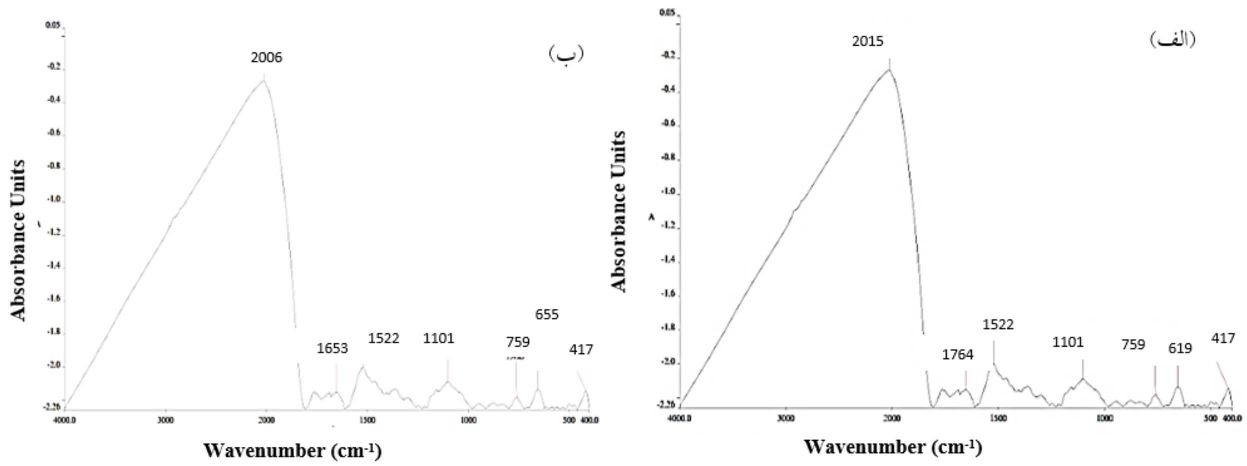
منحنی‌های طیف نگاری مادون قرمز (FT-IR) نمونه‌های تک‌لایه سیلیکا دو سری a و h تولید شده در شکل (۳) دیده می‌شود. مشخصاً پیک‌ها در cm^{-1} ۴۵۰،۸۰۰ و ۱۰۸۰ به ترتیب مربوط به ارتعاشات کششی جنبشی یا نوسانی، خمشی و نامتقارن پل‌های سیلیکا هستند [14-15]. در پوشش‌های سیلیکا پیوند سیلیکا در cm^{-1} ۱۱۰۰ و ۴۱۵ رخ داده است. ارتفاع پیک‌ها نشان از شدت و میزان گروه‌های عاملی است. همان طور که مشاهده می‌شود، پیک‌های s-a نسبت به پیک های s-h دارای شدت بیشتری است. واکنش‌های هیدرولیز و چگالش سیلسیم در رابطه‌های (۱)، (۲) و (۳) ملاحظه می‌شوند [16-20].

$$Si\text{-}OR + H_2O \underset{\text{استری شدن}}{\overset{\text{هیدرولیز}}{\rightleftarrows}} Si\text{-}OH + ROH \qquad (۱)$$

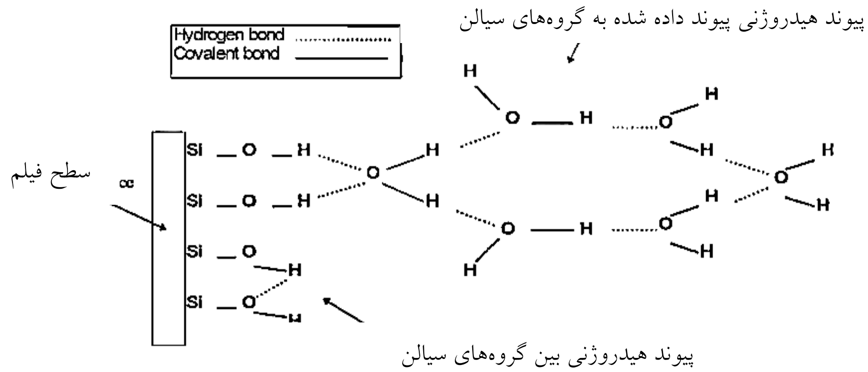
$$Si\text{-}OR + HO\text{-}Si \underset{\text{الکولیز}}{\overset{\text{چگالش الکلی}}{\rightleftarrows}} Si\text{-}O\text{-}Si + ROH^{-} \qquad (۲)$$

$$Si\text{-}OH + HO\text{-}Si \underset{\text{هیدرولیز}}{\overset{\text{چگالش آبی}}{\rightleftarrows}} Si\text{-}O\text{-}Si + H_2O \qquad (۳)$$

در فرایند هیدرولیزTEOS، گروه‌های هیدروکسیل سیلیکاتی (Si–OH) تشکیل می‌شوند. در صورتی که این گروه‌ها به طور کامل وارد واکنش‌های چگالش نشوند، به صورت گروه‌های سیلان باقی می‌مانند و در سطح پوشش نهایی حضور خواهند داشت. این گروه‌های سیلان با ایجاد پیوندهای هیدروژنی با مولکول‌های آب، موجب افزایش آب‌دوستی سطح می‌شوند. همان طور که در شکل (۴) نشان داده شده است [21]، این پدیده منجر به جذب قابل توجه آب از محیط می‌گردد. افزودن PDMS به سیستم، از طریق فرایند دهیدراته‌سازی، موجب کاهش تعداد گروه‌های هیدروکسیل سطحی می‌شود و در عوض، گروه‌های متیل آب‌گریز ($-CH_3$) را به ساختار پوشش معرفی می‌کند [22]. این تغییر شیمیایی باعث کاهش تمایل سطح به جذب آب و افزایش خاصیت آب‌گریزی پوشش می‌شود. در هر دو نمونه پوشش s-a و s-h، حضور پیک‌های مشخصه گروه $Si–CH_3$ در نواحی طیفی cm^{-1} ۱۲۶۰ و همچنین بین cm^{-1} ۹۰۰–۹۲۰ مشاهده شده است، که نشان دهنده وقوع واکنش‌های کووالانسی بین PDMS و ذرات سیلیکا است. همچنین، پیک جذب در cm^{-1} ۱۶۴۰ که مربوط به جذب فیزیکی آب از محیط است، در نمونه s-h دیده می‌شود اما در نمونه s-a وجود ندارد. این تفاوت نشان می‌دهد که فرایند لایه‌نشانی در نمونه s-a مؤثرتر است و منجر به کاهش جذب رطوبت سطحی شده است.



شکل ۳ طیف جذب پوشش‌های تک‌لایه سیلیکا: (الف) s-h، (ب) s-a

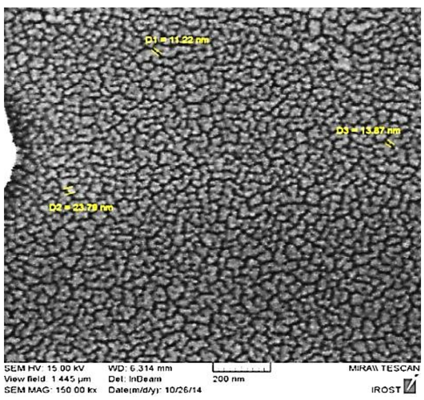


شکل ۴ شماتیک آب‌دوستی سطح پوشش‌های TEOS [21]

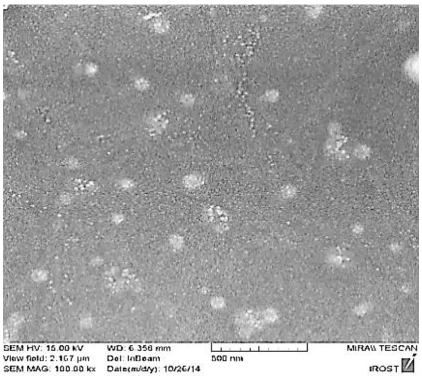
تصاویر میکروسکوپی

تصاویر میکروسکوپی پوشش‌های s-a و s-h در شکل (۵) مشاهده می‌شود. بر سطح پوشش s-a جزایر سفید رنگی دیده می‌شود. این ناخالصی‌ها به علت غوطه وری پوشش در محلول PDMS و عدم عملیات حرارتی پس از غوطه وری تشکیل شده است. با چشم غیر مسلح نیز می‌توان وجود لکه‌ها را مشاهده کرد. اما در حالت s-h چون در محلول سل از PDMS استفاده شده، این لکه‌ها بر سطح دیده نمی‌شوند و پوشش یکنواخت‌تر به نظر می‌رسد. بر اساس تصاویر، اندازه ذرات در پوشش s-a حدود ۱۵ نانومتر و در پوشش s-h حدود ۳۰ نانومتر تخمین زده شده است. این تفاوت اندازه به دلیل واکنش بین ذرات سیلیکا و گروه‌های فعال ارگانوسیلیکون موجود در PDMS است که در شکل (۶) نیز به آن اشاره شده است [23].

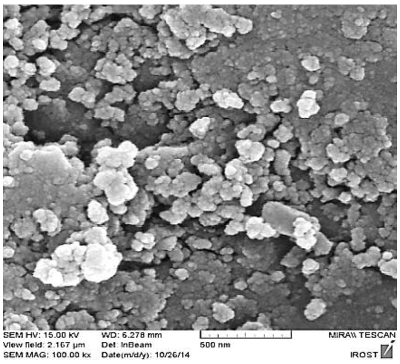
گروه‌های هیدروکسیل موجود در مولکول پلی‌دی‌متیل‌سیلوکسان (PDMS) با گروه‌های هیدروکسیل سطحی ذرات سیلیکا واکنش می‌دهند. این واکنش‌ها منجر به تشکیل پیوندهای کووالانسی قوی بین ذرات شده و در نتیجه، ساختارهایی با اندازه بزرگ‌تر و انسجام بیشتر ایجاد می‌شود.



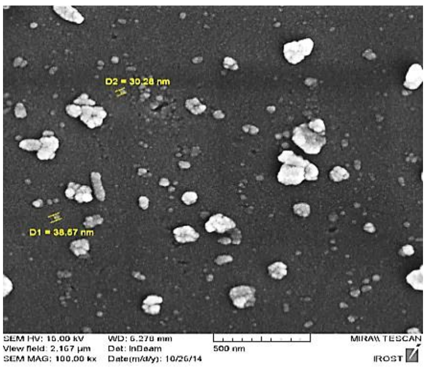
(الف)



(ب)

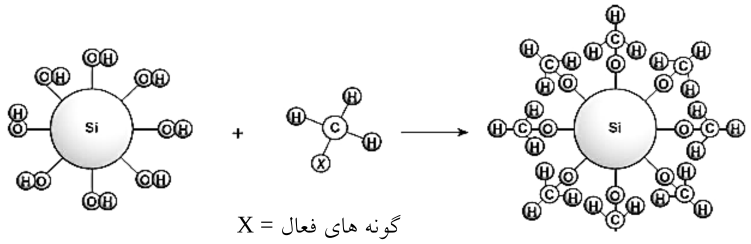


(ج)



(د)

شکل ۵ تصاویر میکروسکوپی پوشش‌های سیلیکا حاوی پلی دی متیل سیلوکسان: (الف و ب) پوشش s-a، (ج و د) پوشش s-h



شکل۶ واکنش ذره SiO_2 با یک اصلاح کننده ارگانوسیالن. X: هر ترکیب ارگانوسیلیکونی که توانایی واکنش با گروه‌های هیدروکسیل سطح را دارد [23]

در نمونه‌ای که PDMS در مرحله سل‌سازی به محلول حاوی TEOS افزوده شده حالت (s-h)، واکنش بین این دو ترکیب باعث تشکیل پیوندهای سیلیکاتی از نوع Si–O–Si در اطراف ذرات سیلیکا می‌گردد. این فرایند نه تنها موجب رشد اندازه ذرات می‌شود، بلکه به افزایش زبری سطح پوشش نیز منجر می‌گردد. افزایش اندازه ذرات تأثیر قابل توجهی بر پراکندگی نور دارد؛ به طوری که سطح زبرتر باعث افزایش پراکندگی و کاهش یکنواختی نوری می‌شود. بررسی نواحی ترک خورده یا شکسته شده پوشش نیز نشان دهنده ساختار کروی ذرات است، که تأییدی بر نحوه تجمع و رشد آن‌ها در فرایند پوشش‌دهی می‌باشد.

رفتار نوری

در جدول (۱) بیشینه عبور نور پوشش‌های تک لایه سیلیکا حاوی پلی دی متیل سیلوکسان مشاهده می‌شود. میزان عبور نور نمونه تک‌لایه سیلیکا s-a که با محلول آب‌گریز پوشش داده شده است، ۹۳٪ است. در پوشش تک لایه سیلیکا بعد از غوطه‌وری در محلول آب‌گریز مقدار کمی تخلخل کاهش یافته و ضریب شکست به میزان کمی افزایش می‌یابد که علت آن پر شدن تخلخل‌ها با ماده آب‌گریز است.

در حالتی که محلول آب‌گریز به سل سیلیکا اضافه شده یعنی s-h مقدار عبور نور نیز به میزان ۹۳/۲۵٪ اندازه‌گیری شده است. در این حالت در طول موج‌های بیشتری عبور نور بیشینه است. هنگامی که PDMS به محلول سل افزوده می‌شود، با TEOS واکنش می‌دهد و ممکن است به دو صورت عمل کند:

۱. تشکیل لایه‌هایی اطراف ذرات سیلیکا
۲. ایجاد زنجیره‌های خطی بین ذرات

در هر دو حالت، این واکنش‌ها منجر به افزایش ویسکوزیته محلول، کاهش تخلخل و در نهایت افزایش ضریب شکست پوشش می‌شوند. با این حال، باید توجه داشت که ضریب شکست PDMS به‌تنهایی حدود ۱/۴ است که نسبت به لایه‌های سیلیکا چگال و بدون تخلخل، مقدار پایین‌تری محسوب می‌شود. بنابراین، با توجه به نتایج حاصل از عبور نور، می‌توان نتیجه گرفت که استفاده از PDMS به عنوان افزودنی، به ویژه در ترکیب با سل سیلیکا، موجب کاهش مؤثر ضریب شکست فیلم نهایی می‌شود و در نتیجه، عبور نور را بهبود می‌بخشد.

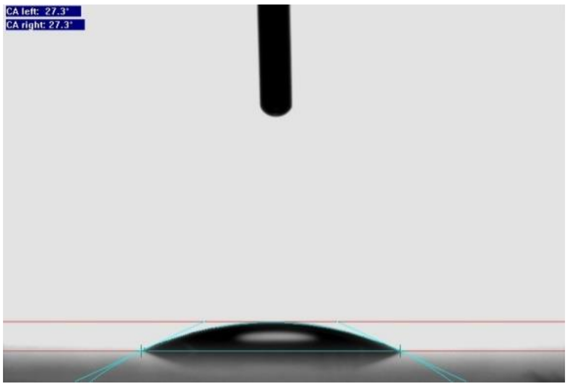
جدول ۱ موقعیت و بیشینه عبور پوشش‌های تک‌لایه سیلیکا حاوی پلی دی متیل سیلوکسان

نمونه	بیشینه عبور نور ٪	موقعیت بیشینه عبور (nm)
s-a	۹۳/۰۰	۵۵۰-۶۴۰
s-h	۹۳/۲۵	۴۰۰-۷۰۰

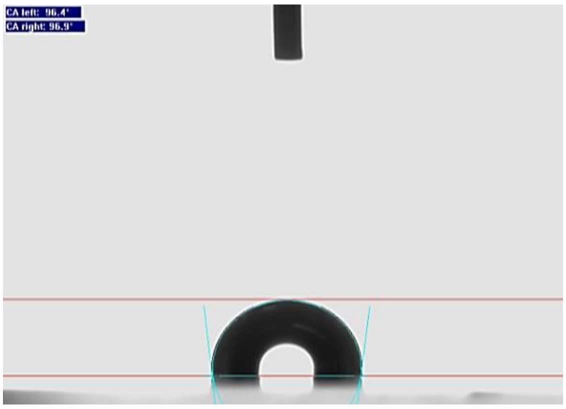
زاویه تماس

زاویه ترشوندگی سطح شیشه بدون پوشش و شیشه پوشش‌دار با فیلم سیلیکایی حاوی PDMS مورد بررسی قرار گرفت. با توجه به شباهت نتایج حاصل از دو روش استفاده از پلی‌دی‌متیل‌سیلوکسان، تنها یکی از تصاویر در شکل (۷) ارائه شده است. زاویه تماس با سطح شیشه بدون پوشش حدود ۲۵ درجه و با سطح پوشش‌دار حدود ۹۵ درجه اندازه‌گیری شد که نشان دهنده افزایش قابل توجه خاصیت آب‌گریزی در اثر اعمال پوشش است. به طور کلی، آب‌گریزی سطح به دو عامل اصلی وابسته است: ۱) زبری سطح و ۲) ترکیب شیمیایی آن[۲۴]. PDMS هر دو عامل را فراهم می‌کند؛ عامل اول اینکه PDMS با

سطح انرژی کم، دارای خاصیت آب‌گریزی ذاتی است. با توجه به نتایج طیف‌نگاری مادون قرمز بعضی گروه‌های سیالن بر سطح فیلم با گروه‌های متیل جایگزین شده و منجر به تغییر در فعالیت سطح می‌شود. عامل دوم نیز با توجه به تصاویر میکروسکوپی نشان می‌دهند که حضور PDMS باعث افزایش اندازه ذرات سیلیکا در سل شده و در نتیجه زبری سطح افزایش یافته است. این افزایش زبری، همراه با کاهش انرژی سطحی، نقش مهمی در تقویت خاصیت آب‌گریزی ایفا می‌کند. لذا پوشش به دست آمده به علت خواص آب‌گریزی پایدار است.



(الف)



(ب)

شکل ۷ زاویه تماس: (الف) شیشه بدون پوشش، (ب) پوشش سیلیکا حاوی پلی‌دی‌متیل‌سیلوکسان

نتیجه‌گیری

در این پژوهش، پوششی بر پایه سیلیکا حاوی پلی‌دی‌متیل‌سیلوکسان (PDMS) با استفاده از روش ساده و مقرون‌به‌صرفه سل ـ ژل، به طور موفقیت‌آمیز بر سطح شیشه لایه‌نشانی شد. به منظور بررسی تأثیر PDMS، دو رویکرد مورد ارزیابی قرار گرفت: ۱. افزودن PDMS به سل سیلیکا و ۲. اعمال آن بر روی پوشش سیلیکا پس از تشکیل. نتایج تجربی نشان دادند که هر دو روش موجب افزایش حدود ۳ درصدی عبور نور نسبت به شیشه بدون پوشش شدند. زاویه تماس سطح پوشش‌دار حدود ۹۵ درجه اندازه‌گیری شد که بیانگر خاصیت آب‌گریزی قابل توجه آن است. این ویژگی به حضور گروه‌های آلی آب‌گریز در پیش‌ماده PDMS نسبت داده می‌شود که با کاهش ترشوندگی سطح، موجب افزایش مقاومت در برابر جذب آب می‌گردند. با توجه به ماهیت آب‌گریز و پیوندهای شیمیایی قوی‌تر، انتظار می‌رود این پوشش در طول زمان پایداری مناسبی از نظر عملکرد نوری و ساختاری داشته باشد.

واژه‌نامه

فارسی	English Term
پوشش ضدبازتاب	Anti-reflective coating (ARC)
سلول‌های فتوولتائیک	Photovoltaic (PV) cells
سیلیکا	Silica (SiO_2)
روش سل ـ ژل	Sol–gel method
پلی‌دی‌متیل‌سیلوکسان	Polydimethylsiloxane (PDMS)
آبگریزی	Hydrophobicity
زاویه تماس	Contact angle
طیف‌سنجی عبوری (UV–Vis)	Transmission spectroscopy (UV-Vis)
طیف‌سنجی مادون قرمز تبدیل فوریه	Fourier-transform infrared spectroscopy (FT-IR)
میکروسکوپ الکترونی روبشی	Scanning electron microscopy (SEM)
ضریب شکست	Refractive index (RI)
خاصیت خودتمیزشوندگی	Self-cleaning property
گروه‌های هیدروکسیل	Hydroxyl groups (–OH)
گروه‌های متیل	Methyl groups ($–CH_3$)
پیوند کووالانسی	Covalent bond
تخلخل	Porosity
پوشش‌دهی غوطه‌وری	Dip-coating
عملیات حرارتی	Thermal treatment

جذب رطوبت	Moisture absorption
عملکرد نوری	Optical performance

تقدیر و تشکر

مراجع

[1] M. S. Mozumder, A. H. I. Mourad, H. Pervez, and R. Surkatti, "Recent developments in multifunctional coatings for solar panel applications: A review," *Solar Energy Materials and Solar Cells*, vol. 189, pp. 75–102, 2019. https://doi.org/10.1016/j.solmat.2018.09.015

[2] L. A. N. Aspa, and C. M. L. Escutin, "A Review of additives and their effects on the hydrophobicity and abrasion resistance of dip-coated silica-based anti-reflective coatings for solar panels," *Materials Science Forum*, vol 1076, pp. 83-88, 2022. https://doi.org/10.1088/2053-1591/abf6fb

[3] Q. Zhang, H. Liu, S. Zhao, and W. Dong, "Hydrophobic and optical properties of silica antireflective coating prepared via sol-gel method," *Materials Research Express*, vol. 8, no. 4, p. 046403, 2021. https://doi.org/10.4028/p-34oh76

[4] Y. Zhu, L. Chen, C. Zhang, and Z. Guan, "Preparation of hydrophobic antireflective SiO_2 coating with deposition of PDMS from water-based SiO_2–PEG sol," *Applied Surface Science*, vol. 455, pp. 103–110, 2018. https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2018.06.177

[5] G. San Vicente, R. Bayón, N. Germán, Morales, "A Long-term durability of sol–gel porous coatings for solar glass covers," *Thin Solid Films*, vol. 517, pp. 3157–3160, 2009. https://doi.org/10.1016/j.tsf.2008.11.079

[6] W. Zhang, C. Ye, and Q. Liu, "Development of anti-reflective coatings with photocatalytic and hydrophobic self-cleaning property for solar cells," *Surfaces and Interfaces*, vol. 65, Art. no. 106454, 2025. https://doi.org/10.1016/j.surfin.2025.106454

[7] H. Salehi, A. Eshaghi, M. Rezazadeh, and H. Zabolian, "Antireflective and anti-dust modified silica based thin film on solar cell cover glass," *Journal of Alloys and Compounds*, vol. 892, p. 162228, 2022.

[8] J. Zhi and L. Z. Zhang, "Durable superhydrophobic surface with highly antireflective and self-cleaning properties for the glass covers of solar cells," *Applied Surface Science*, vol. 454, pp. 239–248, 2018. https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2018.05.139

[9] A. Syafiq, V. Balakrishnan, M. S. Ali, S. J. Dhoble, N. A. Rahim, A. Omar, and A. H. Abu Bakar, "Application of transparent self-cleaning coating for photovoltaic panel: a review," *Chemical Engineering*, vol. 36, p. 100801, 2022. https://doi.org/10.1016/j.coche.2022.100801

[10] A. Wan I. Wan, N. Wan I. Wan, S. Abdul K. Aemi, and M. M. Sanagi, "Preparation and characterization of a new sol–gel hybrid based tetraethoxysilane-polydimethylsiloxane as a stir bar extraction sorbent material," *Journal of Sol-Gel Science and Technology*, vol. 58, no. 3, pp. 602–611, 2011. https://doi.org/10.1007/s10971-011-2434-7 .

[11] K. Sinko, "Influence of chemical conditions on the nanoporous structure of silicate aerogels," *Materials*, vol. 3, pp. 704–740, 2010. https://doi.org/10.3390/ma3010704

[12] Y. Zhang, X. Zhang, H. Ye, B. Xiao, L. Yan, Jiang. Bo, "A simple route to prepare crack-free thick antireflective silica coatings with improved antireflective stability," *Materials Letters*, vol. 69, pp. 86–88, 2012. https://doi.org/10.1016/j.matlet.2011.11.043

[13] V. V. Ganbavle, U. K. H. Bangi, S. S. Latthe, S. A. Mahadik, and A. V. Rao, "Self-cleaning silica coatings on glass by single step sol–gel route," *Surface & Coatings Technology*, vol. 205, pp. 5338–5344, 2011. https://doi.org/10.1016/j.surfcoat.2011.05.055

[14] S. E. Babayan, J. Y. Jeong, A. Schutze, V J. Tu, M. Moravej, G S. Selwyn, R F. Hicks, "Deposition of silicon dioxide films with a non-equilibrium atmospheric-pressure plasma jet," *Plasma Sources Sci. Technol*, vol. 10, pp. 573–57, 2001. https://doi.org/10.1088/0963-0252/10/4/305

[15] V. Purcar, I. Stamatin, O. Cinteza, C. Petcu, V. Raditoiu, M. Ghiurea, T. Miclaus, A. Andronie, "Fabrication of hydrophobic and antireflective coatings based on hybrid silica films by sol–gel process," *Surface & Coatings Technology*, vol. 206, pp. 4449–4454, 2012. https://doi.org/10.1016/j.surfcoat.2012.04.094

[16] C. J. Brinker, "Hydrolysis and condensation of silicates: effects on structure," *Journal of Non-Crystalline Solids*, vol. 100, pp. 31–50, 1988. https://doi.org/10.1016/0022-3093(88)90005-1

[17] C. Milea, A. Bogatu, and A. Duta, "Silica sol-gel process," *Bulletin of the Transilvania University of Brasov, Series I: Engineering Sciences*, vol. 4, no. 1, pp. 59–66, 2011. https://webbut.unitbv.ro/index.php/Series_I/article/view/6140

[18] X. Shi, D. Graiver, and R. Narayan, "Hydrolysis and condensation of hydrophilic alkoxysilanes under acidic conditions," *Silicon*, vol. 4, pp. 109–119, 2012. https://doi.org/10.1007/s12633-012-9108-0

[19] M. M. Adnan, A. R. M. Dalod, M. H. Balci, M. A. Einarsrud, and J. Glaum, "In situ synthesis of hybrid inorganic–polymer nanocomposites," *Polymers*, vol. 10, no. 10, pp. 1129, 2018. https://doi.org/10.3390/polym10101129

[20] A. M. Abebe, G. D. Soraru, G. Thothadri, D. M. Andoshe, A. Zambotti, G. M. S. Ahmed, V. Tirth, and A. Algahtani, "Synthesis and characterization of high surface area transparent SiOC aerogels from hybrid silicon alkoxide: A comparison between ambient pressure and supercritical drying," *Materials*, vol. 15, no. 4, pp. 1277, 2022. https://doi.org/10.3390/ma15041277

[21] P. Lavin, "Optimization of ormosil thin films for sensor applications," *School of Physical Sciences, Dublin City University*, 1997.

[22] O. Kesmez, H. Erdem, E. Burunkaya, E. Arpac, "Preparation of antireflective SiO_2 nanometric films," *Ceramics International*, vol. 36, pp. 391–394, 2010. https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2009.07.030

[23] X. Wang, J. Shen, "A review of contamination-resistant antireflective sol–gel coatings," *J Sol-Gel Sci Technol*, vol. 61, pp. 206–212, 2012. https://doi.org/10.1007/s10971-011-2615-4

[24] S. Cai, Y. Zhang, H. Zhang, H. Yan, H. Lv, B. Jiang. "Sol−Gel preparation of hydrophobic silica antireflective coatings with low refractive index by base/acid two-step catalysis," *ACS applied materials & interfaces*, vol. 6, pp. 11470−11475, 2014. https://doi.org/10.1021/am501972y